Index

Commentationes et Relationes

Anderson, A. B., Parr, R. G.: A Poisson Equation for Vibrational Potentials of Diatomic Molecules 301

Armstrong, D. R., Perkins, P. G., Scott, J. M., Stewart, J. J. P.: The Electronic Structures of Some Tetrazaborolines and Dimethyltetrazadieneirontricarbonyl 237

Bacskay, G. B., Linnett, J. W.: Mixed Basis Functions in Molecular Quantum Mechanics. I. Computational Methods and Preliminary Study of the Helium Atom 1

Bacskay, G. B., Linnett, J. W.: Mixed Basis Functions in Molecular Quantum Mechanics. II. A Study of the H_2 Molecule 15

Bacskay, G. B., Linnett, J. W.: Mixed Basis Functions in Molecular Quantum Mechanics. III. The Linear Symmetric H_3 Molecule 23

Bacskay, G. B.: Mixed Basis Functions in Molecular Quantum Mechanics. IV. The Linear, Equidistant System of Four Interacting Hydrogen Atoms 33

Bailey, M. L.: Calculation of Oscillator Strengths for π-Electron Molecules 87

Barber, M. S., see Palmer, M. H., et al. 357

Berthier, G., Bonaccorsi, R., Scrocco, E., Tomasi, J.: The Electrostatic Molecular Potential for Imidazole, Pyrazole, Oxazole and Isoxazole 101

Bonaccorsi, R., see Berthier, G., et al. 101

Brogli, F., Heilbronner, E.: Correlation of Hückel Molecular Orbital Energies with π-Ionization Potentials 289

Burrows, B. L.: Perturbation Theory for Excited States of Molecules. III 267

Burrows, B. L.: Perturbation Theory for Excited States. IV 273

Čársky, P., Zahradník, R.: A Remark on the Comparison between the Roothaan Open Shell and Half-Electron Method 171

Cecchi, M. M.: Calculations of Molecular Wave Functions in Terms of Modulated Plane Waves 351

Constanciel, R.: Introduction de la matrice densité de paire dans l'étude théorique du *p*K des états excités 249

Czismadia, I. G., see Strausz, O. P., et al. 367

Denes, A. S., see Strausz, O. P., et al. 367

Duke, B. J., Stephens, D. G.: The Electronic Structure of the $B_2H_5^+$ Ion 381

Ege, G., Vogler, H.: Zur Konjugation in makrocyclischen Bindungssystemen. XX. Charakterordnung, magnetische Suszeptibilitäten und chemische Verschiebungen von Corannulenen. Paramagnetischer Suszeptibilitätsanteil im Innern von Corannulenen 55

Eliezer, I., Reger, A.: Calculations on the Force Constants of Triatomic Group II Metal Halides 283

Ellis, R. L., Kuehnlenz, G., Jaffé, H. H.: The Use of the CNDO Method in Spectroscopy. VI. Further $n - \pi^*$ Transitions 131

Flurry, R. L., Jr., see Howland, J. C. 157

Fueno, T., Nagase, S., Tatsumi, K., Yamaguchi, K.: An Intermolecular Perturbation Approach to the Cycloaddition of Carbenes toward Olefins. Reaction Path and Stereoselectivity 43

Gaskell, A. J., see Palmer, M. H., et al. 357

Goddard, W. A., III, Wilson, C. W., Jr.,: The Role of Kinetic Energy in Chemical Binding II. Contragradience 211

Goddard, W. A., III, see Wilson, C. W., Jr. 195
Gosavi, R. K., see Strausz, O. P., et al. 367

Gouyet, J. F., Prat, M. T.: Correlation Effect on the Singlets $\pi\pi^*$ Transition Energies of Polyacenes 89

Graovac, A., Gutman, I., Trinajstić, N., Živković, T.: Graph Theory and Molecular Orbitals. Application of Sachs Theorem 67

Guidotti, C., Lamanna, U., Maestro, M.: Calculated Physical Properties of a Water Molecule in an Ice-Like Cluster 147
Gutman, I., see Graovac, A., et al. 67
Heilbronner, E., see Brogli, F. 289

Hirst, D. M., Linington, M. E.: The Method of Non-Paired Spatial Orbitals. II. The Benzyl Radical 179

Howland, J. C., Flurry, R. L., Jr.: Acceleration of Convergence by Density Matrix Extrapolation in CNDO/2 Calculations 157

Hush, N. S., Williams, M. L.: Finite Electric Field Valence Shell Calculations of Polarizability Gradients and Raman Depolarization Ratios for Diatomic Molecules . . . 141
Inokuchi, H., see Ohno, K. 331
Jaffé, H. H., see Ellis, R. L., et al. 131

Johansson, A., Kollman, P., Rothenberg, S.: The Electronic Structure of the HCN Dimer and Trimer 97

Jug, K.: Operator Equations in Approximate Molecular Orbital Theories. II. Integral Approximations and Charge Distribution 231
Katriel, J.: An Interpretation of Hund's Rule 163
Kollman, P., see Johansson, A., et al. 97
König, E., Kremer, S.: Detailed Crossover Studies of Transition Metal Ions I. The Octahedral and Tetrahedral d^4 and d^6 Electron Configurations 311
Kremer, S., see König, E. 311
Kuehnlenz, G., see Ellis, R. L., et al. 131

Labarre, J.-F., see Robinet, G., et al. 257
Laidlaw, W. G., Vasudevan, K.: The Stability of the Hartree Fock Solutions of Pentalene and Heptalene 387
Lamanna, V., see Guidotti, C., et al. 147
Leibovici, C., see Robinet, G., et al. 257
Linington, M. E., see Hirst, D. M. 179
Linnett, J. W., see Bacskay, G. B. 1, 15, 23

Loew, G. H., Steinberg, D. A.: Molecular Orbital Calculations of the Active Site Complex of Two Iron Ferredoxins.
II. Electron Distribution, Magnetic Moment, Field Gradients and Electronic Spectra of the Oxidized State 107

Maestro, M., see Guidotti, C., et al. 147

Nagase, S., see Fueno, T., et al. 43

Oberhammer, H.: CNDO/2 Rechnungen für einige Schwefelverbindungen 79
CNDO/2 *Calculations for Some Sulfur Compounds*
Ohno, K., Inokuchi, H.: A Self-Consistent Molecular Field Theory for Aggregates of Neutral Molecules. I 331

Palmer, M. H., Gaskell, A. J., Barber, M. S.: *Ab initio* Molecular Orbital Calculations 2. A comparison of Polarisation Function Addition to Minimal Bases, and Molecular Scaling. Computations on Furan, Pyrrole and 1,2,5-Oxadiazole 357
Parr, R. G., see Anderson, A. B. 301
Perkins, P. G., see Armstrong, D. R., et al. 237

Peterson, C., Pfeiffer, G. V.: *Ab initio* Valence-Bond Calculations of H_2O I. Bond Dissociation Energies 321
Pfeiffer, G. V., see Peterson, C. 321

Pouzard, G., Pujol, L.: Energie des systèmes H_2, HHe^+ et LiH 187
Prat, M. T., see Gouyet, J. F. 89
Pujol, L., see Pouzard, G. 187

Reger, A., see Eliezer, I. 283
Reinsch, E.-A.: Das Kastenmodell als Grundlage für ein *ab initio* Verfahren IV. Bindungsbildung beim Wasserstoffmolekül 279
Robinet, G., Leibovici, C., Labarre, J.-F.: Analyse conformationnelle théorique du diméthylsulfoxyde $(CH_3)_2SO$ 257
Rothenberg, S., see Johansson, A., et al. 97
Salvetti, O., see Cecchi, M. M. 351
Scott, J. M., see Armstrong, D. R., et al. 237
Scrocco, E., see Berthier, G., et al. 101
Steinberg, D. A., see Loew, G. H. 107
Stephens, D. G., see Duke, B. J. 381
Stewart, J. J. P., see Armstrong, D. R., et al. 237
Strausz, O. P., Gosavi, R. K., Denes, A. S., Czismadia, I. G.: Molecular Orbital Calculations on the Ethylene Episulfide Molecule and Its Isomers 367
Tatsumi, K., see Fueno, T., et al. 43
Tomasi, J., see Berthier, G., et al. 101
Trinajstić, N., see Graovac, A., et al. 67
Vasudevan, K., see Laidlaw, W. G. 387
Vogler, H., see Ege, G. 55
Williams, M. L., see Hush, N. S. 141
Wilson, C. W., Jr., Goddard, W. A., III: The Role of Kinetic Energy in Chemical Binding I. The Nonclassical or Exchange Kinetic Energy 195
Wilson, C. W., Jr., see Goddard, W. A., III 211
Yamaguchi, K., see Fueno, T., et al. 43
Zahradník, R., see Čarsky, P. 171
Živković, T., see Graovac, A., et al. 67

Annotatio

Grabenstetter, J. E., Whitehead, M. A.: Comment on a Paper by Stout and Politzer. . . 390
Whitehead, M. A., see Grabenstetter, J. E. 390

Recensiones

Englmann, R.: The Jahn-Teller Effect in Molecules and Crystals (Ref. C. J. Ballhausen) 391
Gutmann, V.: Chemische Funktionslehre. (Ref. F. Wasgestian) 194
Kutzelnigg, W., Re, G. del, Berthier, G.: σ and π Electrons in Organic Compounds (Ref. K. Jug) 392

Indexed in Current Contents

Instructions to Authors

1. *Manuscripts* should be submitted in duplicate, typed in double-line spacing on one side of the paper only. Form and contents should be carefully checked to exclude the need for corrections in proof. To speed up publication, authors will receive only one set of proofs: provisionally numbered page proofs. Authors are requested to correct typographical errors only; they will be charged for corrections involving changes, additions, or deletions to the original manuscript.

Formulae should be typewritten whenever possible, special attention being given to the placing of indices and exponents so that they are recognizable as such even though there is no difference in size. Formulae should preferably be written in a "linear" form (e.g. $\exp(-\varepsilon/kT)$ instead of $e^{-\frac{\varepsilon}{kT}}$). Special typefaces (Greek, Script) should be shown by underlining in color. To avoid confusing the printer, please use red for Greek and green for Script, and underline in brown for bold face. Characters which are easily confused, e.g. 0 (zero) and capital O (letter) or 1 (figure one) and small *l* (letter), should have some special distinguishing mark. When formulae are inserted by hand, small letters should be underlined once and capital letters twice.

2. *Illustration copies* (graphs and structural formulae) should be drawn in Indian ink in clean uniform lines and sent in on separate sheets. Please mark in the margin of the manuscript where diagrams and tables should be inserted. Captions, which should be brief, should be typed separately and attached to the manuscript.

3. Original papers should be preceded by a *summary* (not more than 100 words) in English, German and French. (The editorial staff is willing to translate English summaries if asked.) Short notes need only an English summary. Papers not written in English should have an *English title* for use by such journals as Current Contents.

4. *Literature references* should be numbered and listed at the end of the paper. They should be cited as follows: *journal papers* — names and initials of all authors, journal in the accepted abbreviation, volume and page number, year; *books* — names of authors, full title, edition, place, publisher and year. References should be cited in the text by number.

5. *75 offprints* of each paper will be supplied free of charge; additional copies may be ordered at cost price.

6. *Editorial enquiries* should be addressed to:
Prof. Dr. HERMANN HARTMANN, Theoretica Chimica Acta, Institut für physikalische Chemie der Universität, Robert-Mayer-Straße 11, D-6000 Frankfurt am Main 1

Manuscripts should be sent to the Editor or to one of the Co-editors:

Prof. Dr. CARL J. BALLHAUSEN, Chemical Laboratory IV, H. C. Ørstedinstitutet, Universitetsparken 5, København Ø, Danmark,

Prof. Dr. RONALD D. BROWN, Monash University, Department of Chemistry, P. O. Box 92, Clayton, Victoria, Australia 3168,

Prof. Dr. EDGAR HEILBRONNER, Physikalisch-Chemisches Institut der Universität Basel, CH-4000 Basel, Klingelbergstraße 80, Switzerland,

Prof. Dr. J. JORTNER, Department of Chemistry, Tel-Aviv University, Tel-Aviv, Israel,

Prof. Dr. MASAO KOTANI, 36-4 Sanno 3 chome, Ota-ku, Tokyo 143, Japan,

Prof. Dr. JAROSLAV KOUTECKÝ, Československá Akademie Věd. Ústav Fyzikální Chemie, Praha 2-Vinohrady, Máchova 7, ČSSR,

Prof. Dr. JACK W. LINNETT, Department of Physical Chemistry, Lensfield Road, Cambridge, England,

Prof. Dr. E. E. NIKITIN, Institute of Chemical Physics, Academy of Sciences, Vorobyevskoye Chaussée 2b, Moskwa V-334, USSR,

Prof. Dr. RALPH G. PEARSON, Department of Chemistry, Northwestern University, Evanston, Illinois 60201, USA,

Prof. Dr. BERNARD PULLMAN, Université de Paris, Institut de Biologie physico-chimique, 13, rue Pierre Curie, Paris V, France,

Prof. Dr. KLAUS RUEDENBERG, Department of Chemistry, Iowa State University of Science and Technology, Ames, Iowa 50010, USA,

Prof. Dr. CAMILLE SANDORFY, Université de Montréal, Case Postale 6128, Montréal, Canada,

Prof. Dr. MASSIMO SIMONETTA, Istituto di Chimica Fisica dell'Università di Milano, Via Saldini, 50, Milano, Italia,

Prof. Dr. OKTAY SINANOĞLU, Department of Chemistry, Yale University, 225 Prospect Street, New Haven, Conn. 06520, USA.

Hinweise für die Autoren

1. *Manuskripte* werden mit einer Kopie, auf einseitig beschriebenen Blättern mit doppeltem Zeilenabstand erbeten. Die Manuskripte müssen formal wie inhaltlich so durchgearbeitet sein, daß Änderungen in den Korrekturfahnen unnötig sind. Zur Abkürzung der Publikationszeit erhalten die Autoren nur *eine* Seitenkorrektur mit provisorischen (*kursiven*) Seitenzahlen. Es sollen darin nur Satzfehler berichtigt werden. Nachträgliche (vom Manuskript abweichende) Korrekturen müssen den Autoren berechnet werden.

Alle Formeln sind möglichst mit der Maschine zu schreiben. Dabei ist darauf zu achten, daß Indices und Exponenten trotz des fehlenden Größenunterschiedes genau als solche zu erkennen sind. Besondere Lettern (griechische, Script) sind durch farbige Unterstreichungen zu kennzeichnen. Zur Vereinfachung für den Setzer wird gebeten, griechische Buchstaben rot, Scripttypen grün und halbfette braun zu unterstreichen. Auch einander ähnliche Zeichen, z. B. 0 (Null) und O (Buchstabe) oder 1 (Eins) und *l* (Buchstabe) sind besonders zu kennzeichnen. Bei handgeschriebenen Formeln ist bei allen vorkommenden Alphabeten zwischen Groß- und Kleinbuchstaben (durch doppeltes bzw. einfaches Unterstreichen) zu unterscheiden.

2. *Abbildungsvorlagen* werden als Tuschezeichnungen mit tiefschwarzem einheitlichen Strich auf besonderen Blättern erbeten. Am Manuskriptrand ist deutlich ihre Plazierung und die von Tabellen zu vermerken. Kurze Abbildungsunterschriften sollen am Schluß des Manuskripts beigefügt werden.

3. Bei Originalarbeiten wird um je eine *Zusammenfassung* (nicht über 100 Wörter) in Englisch, Deutsch und Französisch, bei Kurzmitteilungen um eine in Englisch gebeten. (Übersetzung ins Französische kann in der Redaktion vorgenommen werden.) Nichtenglischen Arbeiten soll außerdem eine englische Titelübersetzung beigefügt werden.

4. *Literaturangaben* sind am Schluß der Arbeit zusammenzustellen und zu numerieren. Sie enthalten Namen und nachgestellte Initialen aller Autoren, den nach den internationalen Regeln gekürzten Zeitschriftentitel, Band-, Seiten- und Jahreszahl; bei *Büchern* Autorennamen, vollen Titel, Auflage, Ort, Verlag und Jahr. Zitierung im Text erfolgt mit Nummer.

5. Von jeder Arbeit werden *75 Sonderdrucke* kostenlos zur Verfügung gestellt. Weitere Separata können von den Autoren zum Selbstkostenpreis bezogen werden.

6. *Redaktionelle Anfragen* sind zu richten an:
Theoretica Chimica Acta, Prof. Dr. HERMANN HARTMANN.
Manuskripte können an alle Mitherausgeber eingesandt werden. Adressen umstehend.

Indications pour les auteurs

1. Les *manuscripts* seront envoyés en deux exemplaires dactylographiés au recto seulement. Tant la forme extérieure que le contenu doivent avoir leur aspect définitif, afin que des corrections sur les épreuves ne soient plus nécessaires. Afin d'accélérer la publication, les auteurs ne recevront qu'une seule épreuve dont les pages seront numérotées provisoirement. Seul les fautes de typographie devront être corrigées; toute autre correction entraînant des modifications, additions ou suppressions au texte original sera facturée aux auteurs. Dans la mesure du possible les formules doivent être tapées à la machine. On veillera à ce que les indices et les exposants soint facilement reconnaissables lorsqu'ils ne sont pas différenciés par leur taille. Sinon, ils devront être inscrits à la main. Les lettres spéciales (grecques, script) doivent être soulignées en couleur. Pour simplifier le travail du typographe on recommande de souligner en rouge les lettres grecques et en vert les script. Les lettres grasses seront soulignées en brun. Dans la mesure où des caractères manuscrits sont utilisés on distinguera (même pour les caractères latins) les majuscules, qu'on soulignera deux fois, des minuscules, soulignées une fois. Des difficultés spéciales naissent du fait que les machines à écrire ne font pas, en général, de différence entre 0 (zéro) et O (lettre) ainsi qu'entre 1 (un) et *l* (lettre). Dans ce cas, des signes distinctifs sont absolument indispensables.

2. Des *graphiques* et des formules développées doivent être tracés en lignes noires à l'encre de Chine. Veuillez indiquer dans la marge du manuscrit où les graphiques et les tableaux doivent être disposés.

3. Les travaux originaux doivent comporter de brefs *résumés* (100 mots maximum), rédigés dans les 3 langues: anglais, français et allemand. Le résumé des communications brèves doit être rédigé en anglais. (Sur demande, le résumé original peut être traduit par la rédaction, en allemand). Pour faciliter la documentation un titre anglais doit être ajouté à chaque article n'étant pas écrit en anglais.

4. Les *références* bibliographiques seront numérotées et rassemblées à la fin du texte. Les citations se présenteront comme suit: noms et initiales de tous les auteurs, titre du journal abrégé selon les règles internationales, tome, numéros des pages et année. Les *livres* seront cités précédés du nom de l'auteur, titre complet, édition, lieu de publication, éditeur et date de parution. Les références dans le texte doivent être indiquées par des numéros.

5. *75 tirés à part* de chaque article seront remis gratuitement aux auteurs. Pour les exemplaires supplémentaires le prix de revient sera facturé aux auteurs.

6. *Les demandes au rédacteur* doivent être adressées à
Theoretica Chimica Acta, Prof. Dr. HERMANN HARTMANN.
Les *manuscrits* peuvent être envoyés à tous les co-éditeurs (adresses susmentionnées).

Theoretica Chimica Acta

It is a fundamental condition that manuscripts submitted should not have been published elsewhere, in this or any other country. The author must undertake not to publish elsewhere at a later date. With the acceptance of a manuscript for publication, the publishers acquire the sole copyright for all languages and countries. Unless special permission has been granted by the publishers, no photographic reproductions, microform or any other reproductions of a similar nature may be made of the journal, of individual contributions contained therein or of extracts therefrom.

The use in this journal of registered or trade names, trademarks etc. without special acknowledgement does not imply that such names, as defined, by the relevant protection laws, may be regarded as unprotected and thus free for general use.

Grundsätzlich dürfen nur Arbeiten eingereicht werden, die vorher weder im Inland noch im Ausland veröffentlicht worden sind. Der Autor verpflichtet sich, seinen Beitrag auch nachträglich nicht an anderer Stelle zu publizieren. Mit der Annahme des Manuskriptes und seiner Veröffentlichung durch den Verlag geht das Verlagsrecht für alle Sprachen und Länder einschließlich des Rechts der fotomechanischen Wiedergabe oder einer sonstigen Vervielfältigung, auch in Mikroform, an den Verlag über. Jedoch wird gewerblichen Unternehmen für den innerbetrieblichen Gebrauch nach Maßgabe des zwischen dem Börsenverein des Deutschen Buchhandels e. V. und dem Bundesverband der Deutschen Industrie abgeschlossenen Rahmenabkommens die Anfertigung einer fotomechanischen Vervielfältigung gestattet. Wenn für diese Zeitschrift kein Pauschalabkommen mit dem Verlag vereinbart worden ist, ist eine Wertmarke im Betrage von DM 0,40 pro Seite zu verwenden. *Der Verlag läßt diese Beträge den Autorenverbänden zufließen.*

Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen usw. in dieser Zeitschrift berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, daß solche Namen im Sinne der Warenzeichen- und Markenschutz-Gesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürften.

En principe, ne sont acceptés que des articles n'ayant jamais été publiés, ni dans leur pays d'origine, ni à l'étranger. L'auteur s'engage à ne pas remettre son manuscrit ailleurs après acceptation. Dès l'acceptation d'un manuscrit et sa publication par la maison d'édition, le droit d'impression pour toutes langues et tous pays, y compris le droit de reproduction photographique, en microforme ou par tout autre moyen, est acquis par la maison d'édition.

L'utilisation de marques déposées, marques de commerce, etc., dans ce journal, même sans indications particulière, n'implique pas que l'emploi de ces dénominations est exonéré des restrictions qu'imposent les lois régissant l'utilisation des marques déposées, etc.

THEORETICA CHIMICA ACTA

Vol. 26 Fasc. 4

Commentationes

Brogli, F., Heilbronner, E.: Correlation of Hückel Molecular Orbital Energies with π-Ionization Potentials 289

Anderson, A. B., Parr, R. G.: A Poisson Equation for Vibrational Potentials of Diatomic Molecules 301

König, E., Kremer, S.: Detailed Crossover Studies of Transition Metal Ions I. The Octahedral and Tetrahedral d^4 and d^6 Electron Configurations 311

Peterson, C., Pfeiffer, G. V.: *Ab initio* Valence-Bond Calculations of H_2O I. Bond Dissociation Energies 321

Ohno, K., Inokuchi, H.: A Self-Consistent Molecular Field Theory for Aggregates of Neutral Molecules. I 331

Cecchi, M. M., Salvetti, O.: Calculations of Molecular Wave Functions in Terms of Modulated Plane Waves 351

Palmer, M. H., Gaskell, A. J., Barber, M. S.: *Ab initio* Molecular Orbital Calculations 2. A Comparison of Polarisation Function Addition to Minimal Bases, and Molecular Scaling. Computations on Furan, Pyrrole and 1,2,5-Oxadiazole 357

Strausz, O. P., Gosavi, R. K., Denes, A. S., Czismadia, I. G.: Molecular Orbital Calculations on the Ethylene Episulfide Molecule and Its Isomers 367

Duke, B. J., Stephens, D. G.: The Electronic Structure of the $B_2H_5^+$ Ion 381

Relatio

Laidlaw, W. G., Vasudevan, K.: The Stability of the Hartree Fock Solutions of Pentalene and Heptalene 387

Annotatio

Grabenstetter, J. E., Whitehead, M. A.: Comment on a Paper by Stout and Politzer . . . 390

Recensiones

Englmann, R.: The Jahn-Teller Effect in Molecules and Crystals (Ref. C. J. Ballhausen) 391

Kutzelnigg, W., Re, G. del., Berthier, G.: σ and π Electrons in Organic Compounds (Ref. K. Jug) 392

Indexed in Current Contents

Responsible for advertisements: Edgar Seidler, D-1000 Berlin 15, Kurfürstendamm 237
Telephone (0311) 8 83 01 31, Telex: 01-82 811

Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York

Printed in Germany by Brühlsche Universitätsdruckerei, Gießen

© by Springer-Verlag Berlin Heidelberg 1972